



TITLE:

# 新しい材料設計：ハイエントロピー合金

AUTHOR(S):

乾, 晴行; 辻, 伸泰; 新津, 甲大; 陳, 正昊; 浅倉, 誠仁;  
江原, 和輝

---

CITATION:

乾, 晴行 ...[et al]. 新しい材料設計：ハイエントロピー合金. 京都大学アカデミックデイ2018: 研究者と立ち話（ポスター/展示） 2018: 44.

ISSUE DATE:

2018-09-22

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/234919>

RIGHT:





# ハイエントロピー合金

元素の多様性と不均一性に基づく新しい材料の学理

High Entropy Alloys - Science of New Class of Materials Based on Elemental Multiplicity and Heterogeneity

## 実用金属とその強化原理



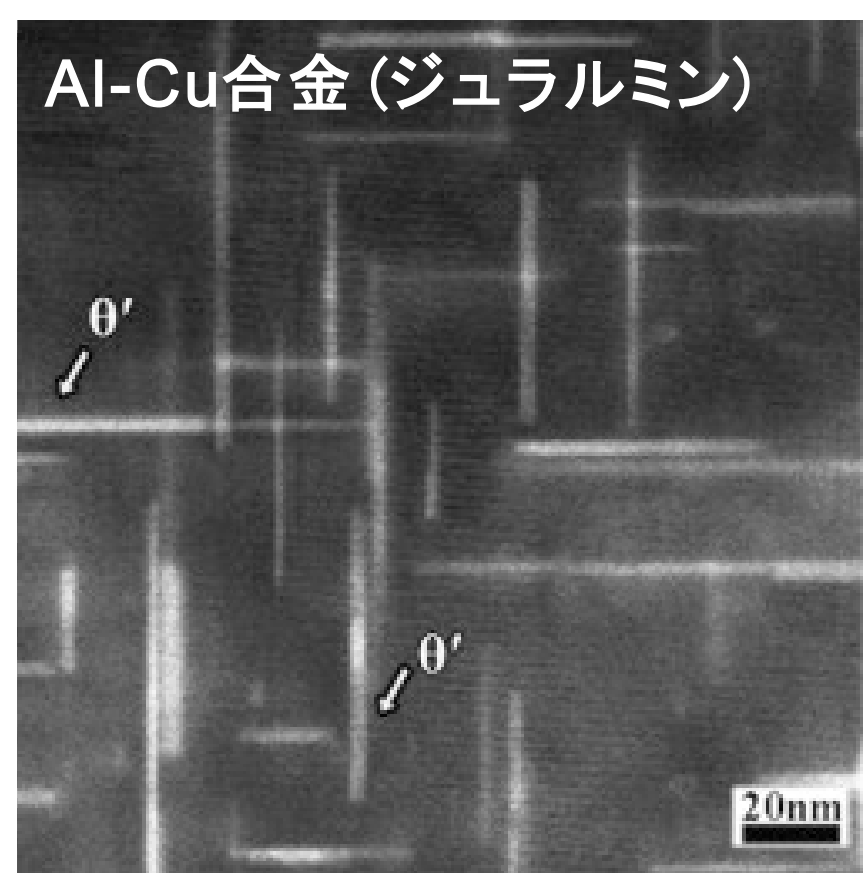
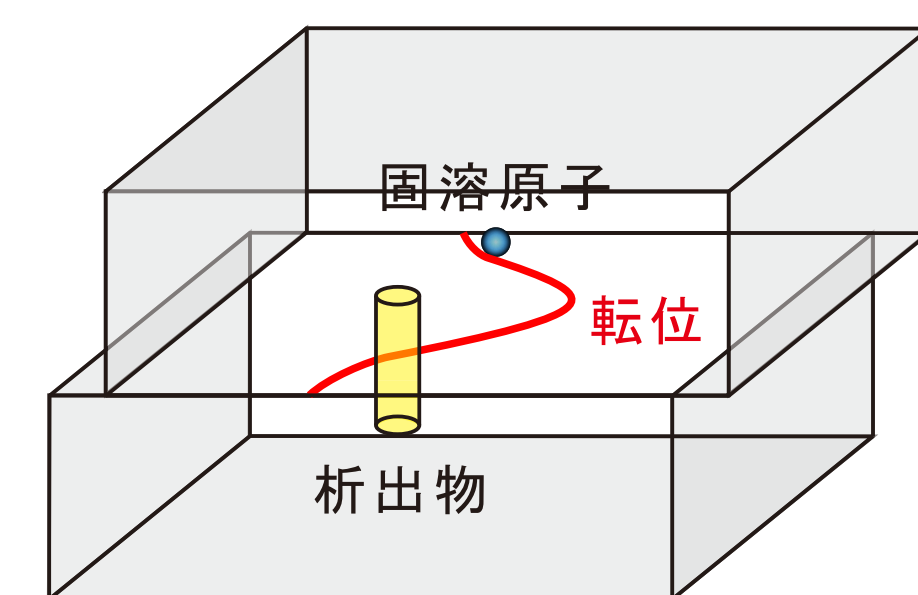
純金属  
例) Fe, Mg, Al...  
柔らかすぎて  
実用化不可能



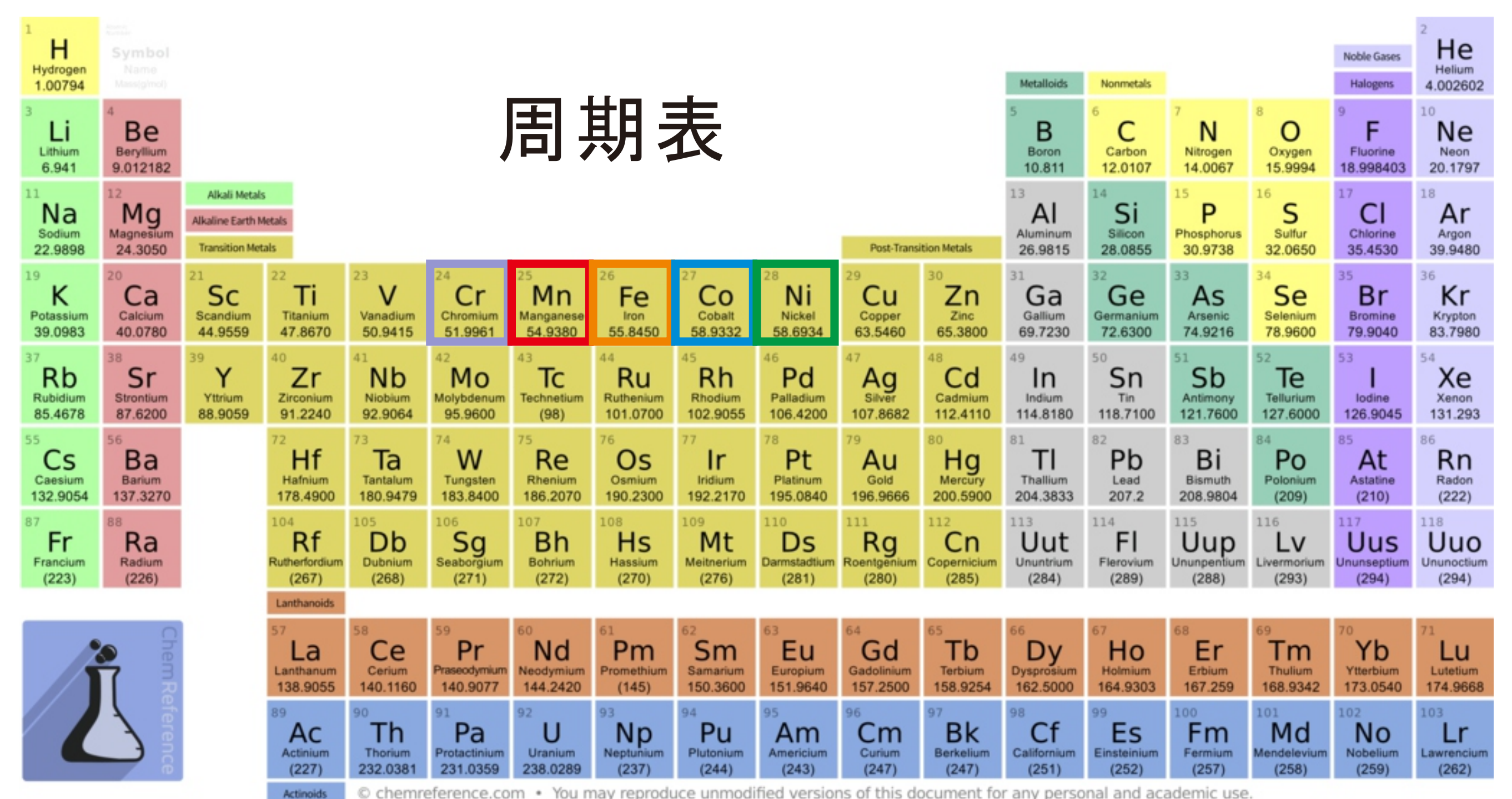
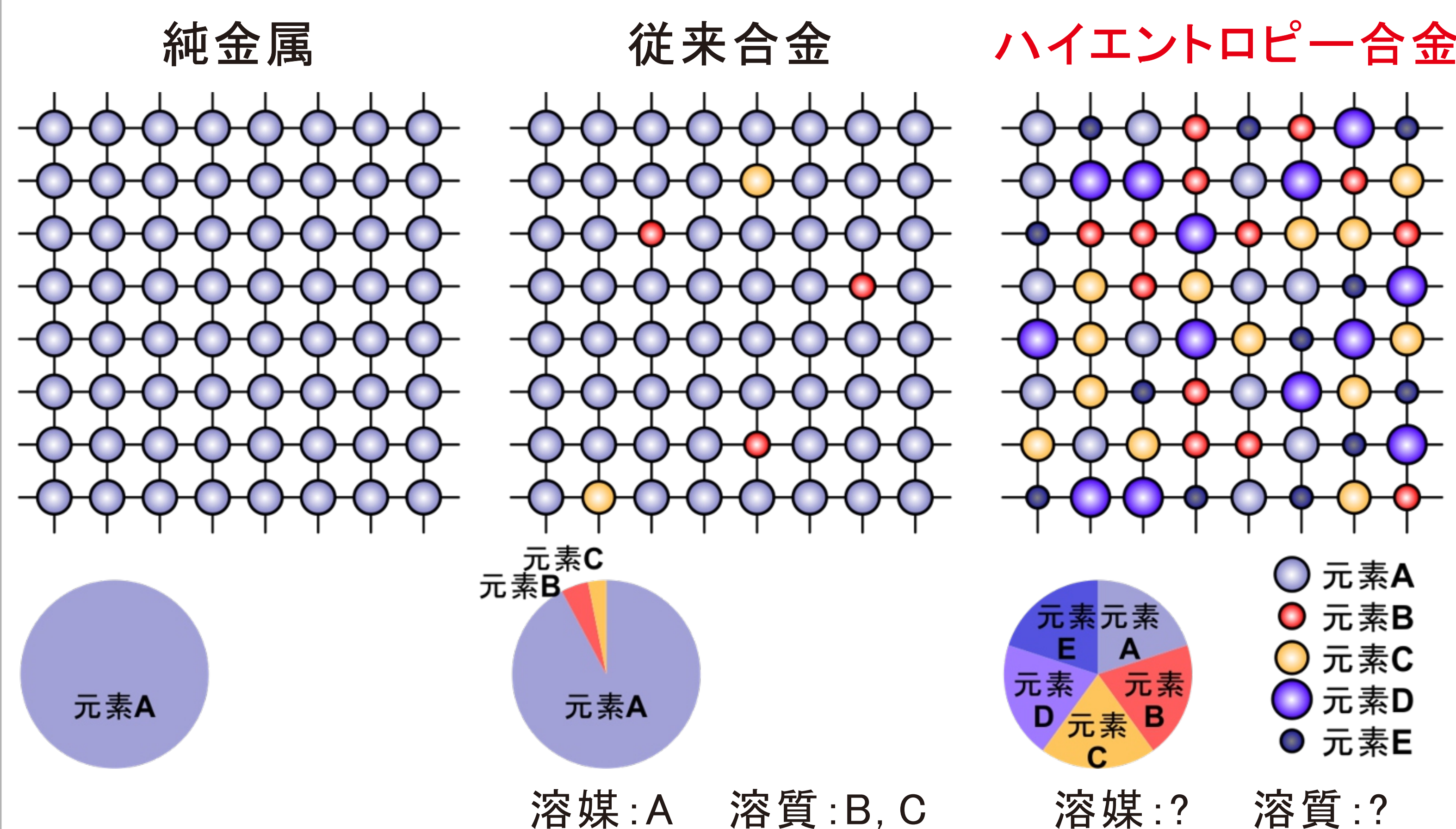
材料の強化原理:  
転位が運動する際に結晶から受ける  
抵抗を増大させること

組織制御

- ・ 固溶化
- ・ 析出
- ・ 結晶粒微細化
- ・ 結晶方位制御 etc..



## ハイエントロピー合金とは



多種の元素がランダムに混ざった固体  
溶媒と溶質を区別することができない

## 特徴1: 高い配置のエントロピー

配置のエントロピー( $S_{\text{conf.}} = -R \sum n_i \ln(n_i)$ )のギブス自由エネルギーへの寄与( $G = H - TS$ )が大きい  
ため化合物形成や相分離を生じにくい

元素数	エントロピー
2	0.69R
3	1.10R
4	1.39R
5	1.61R

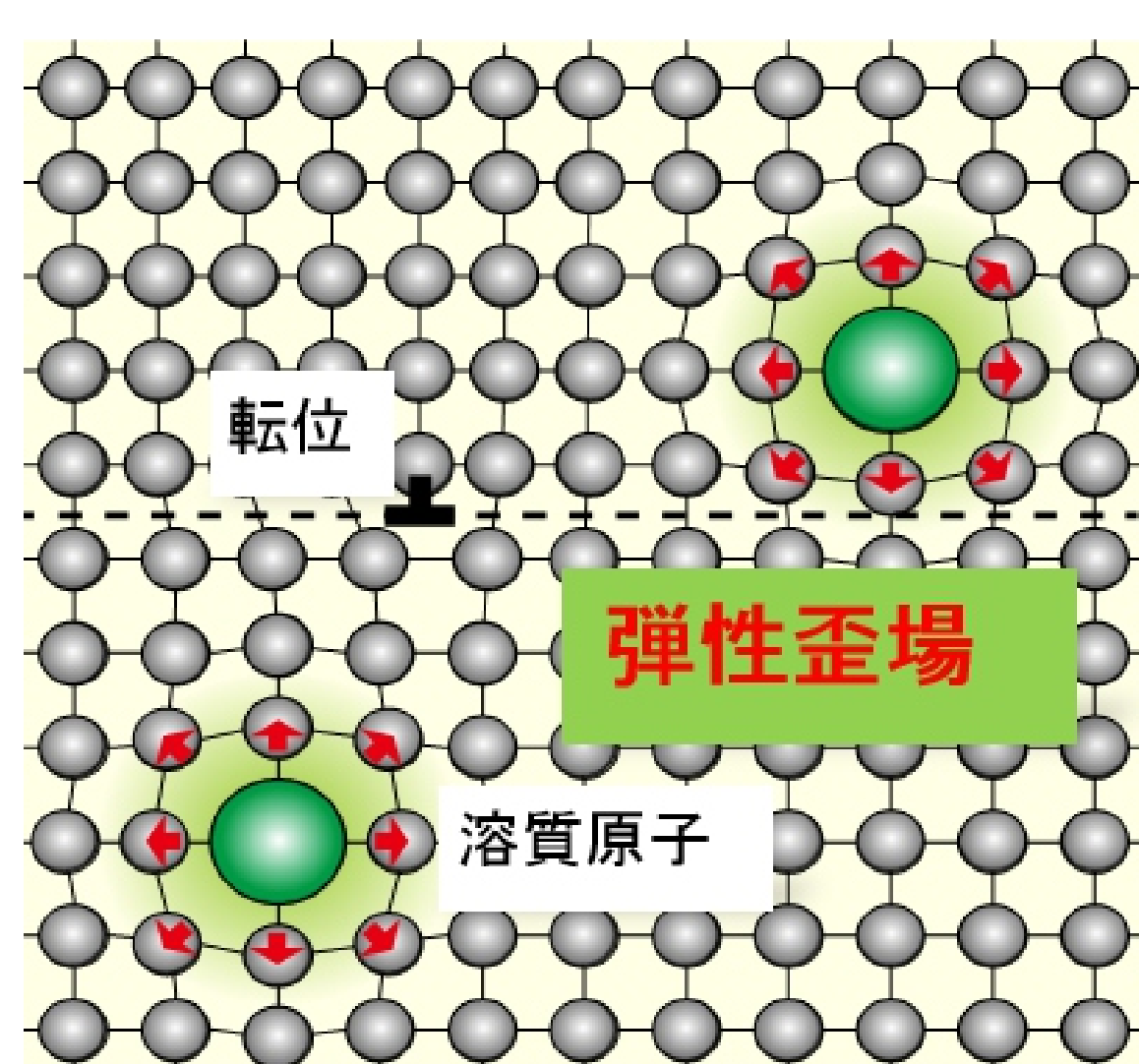


小  $S_{\text{conf.}}$  大

ハイエントロピー合金の例

- ・ FCC構造: CrMnFeCoNi, CrFeCoNiAl, CrFeCoNiCu (3d遷移金属元素)
- ・ BCC構造: TiZrNbHfTa, VNbMoTaW, TiZrNbTaAl (4,5,6族元素)
- ・ HCP構造: YGdTbDyHo, FeCoRuRe, VCoRuRe (含希土類元素)

## 特徴2: 従来の固溶強化理論の限界



Fleisherモデル

適用合金

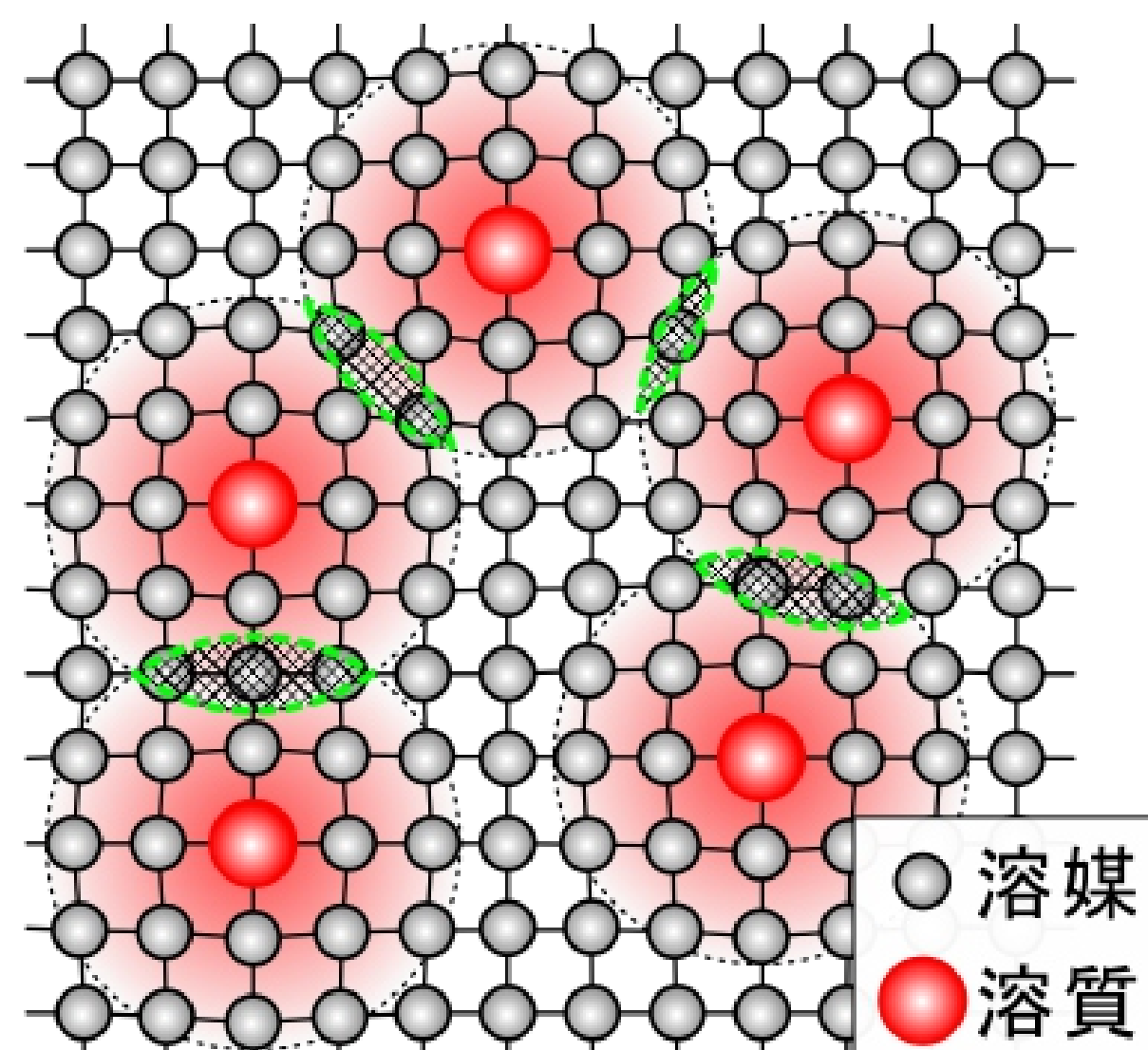
超希薄合金

(固溶度  $c < 0.1 \text{ at.}\%$ )

モデルの特徴

- ・ 孤立溶質原子
- ・ 球対称歪

理論式  $\tau^F = \left( \frac{F_{\text{max}}}{2\Gamma} \right)^{3/2} \left( \frac{2\Gamma}{b^2} \right) c^{1/2}$   **$c^{1/2}$ 則**



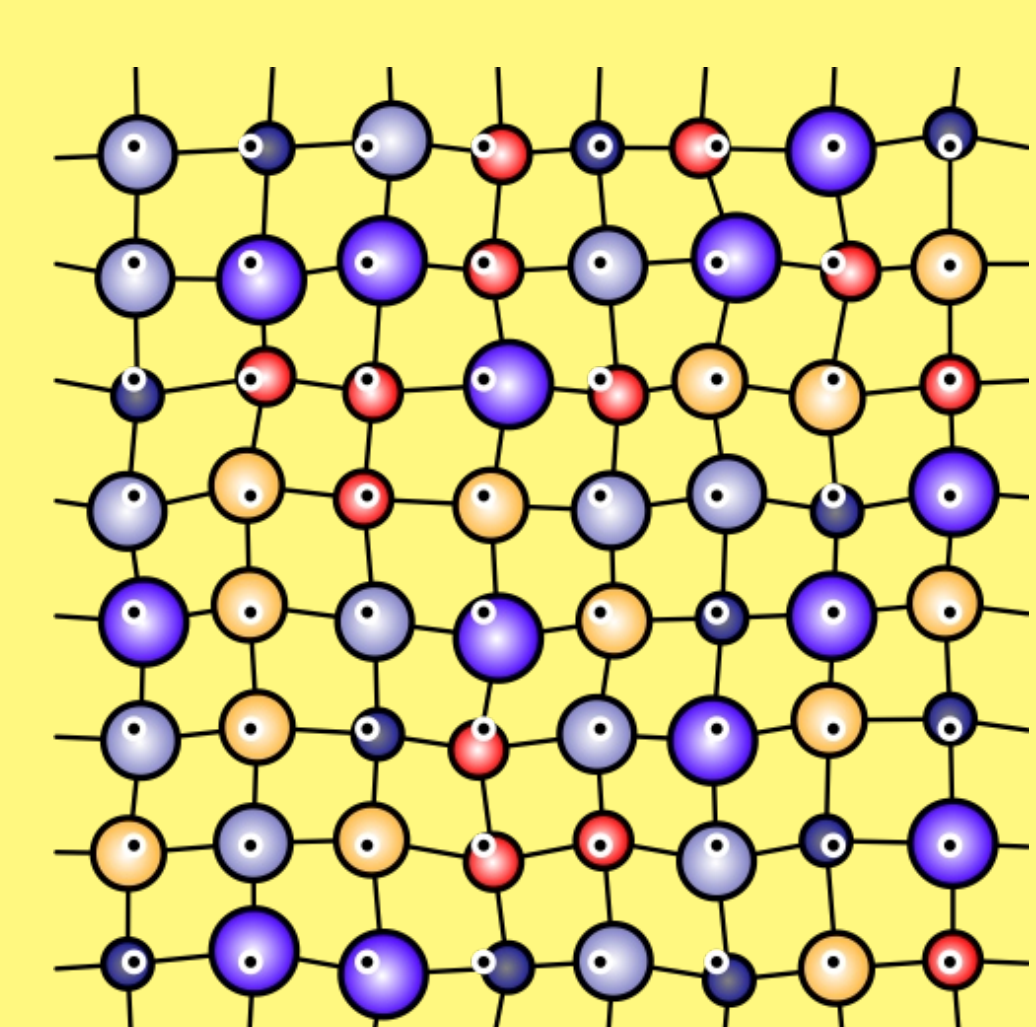
Labuschモデル

希薄合金

(固溶度  $c = 0.1 \sim \text{数 at.}\%$ )

- ・ 複数個の溶質原子集団による歪場の重なり

理論式  $\tau^L = \left( \frac{U_{\text{max}}^4}{w\Gamma b^9} \right)^{1/3} c^{2/3}$   **$c^{2/3}$ 則**



ハイエントロピー合金

等原子量合金

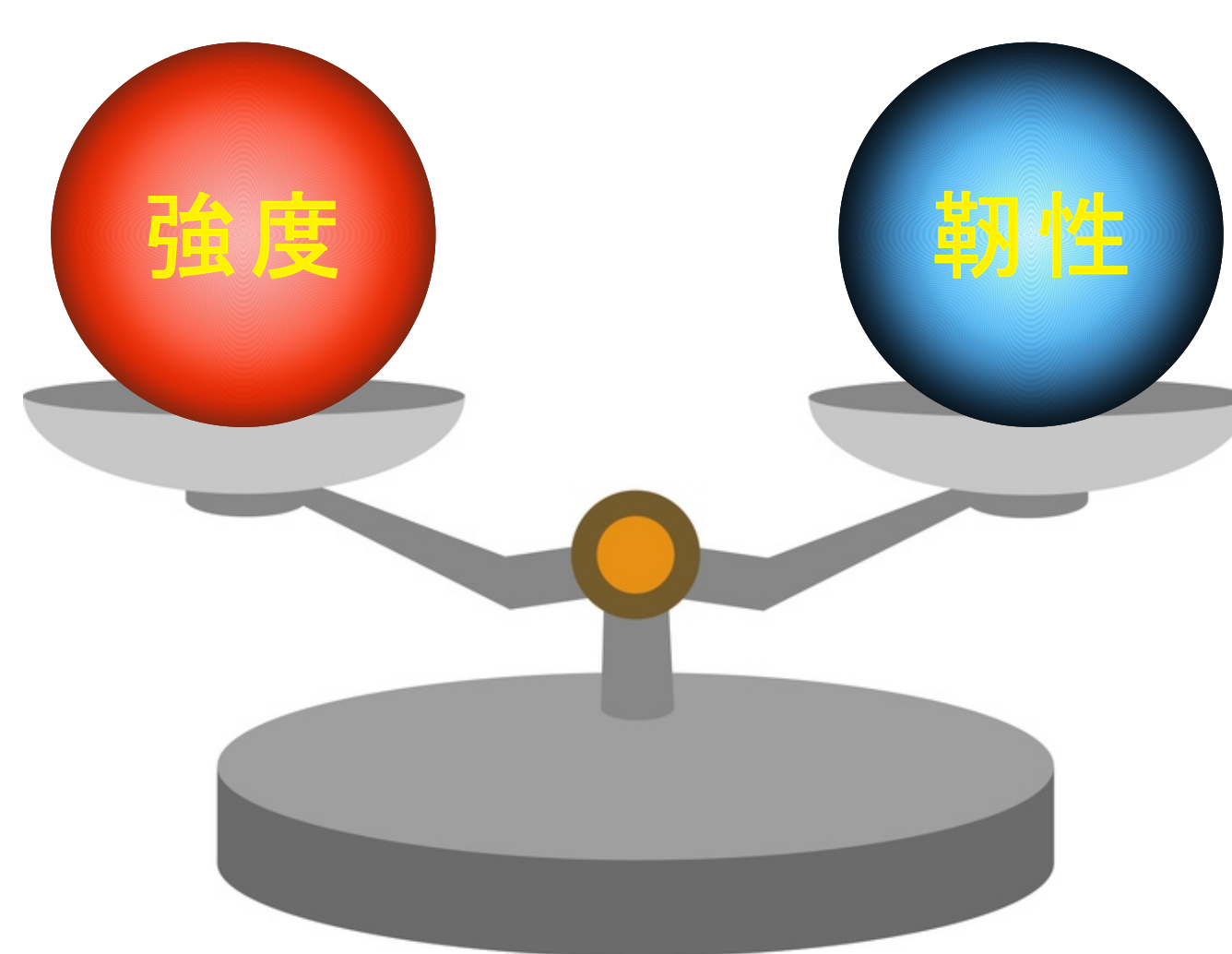
$A_{20}B_{20}C_{20}D_{20}E_{20}$

- ・ 溶質/溶媒の区別が不可
- ・ 複雑な歪場

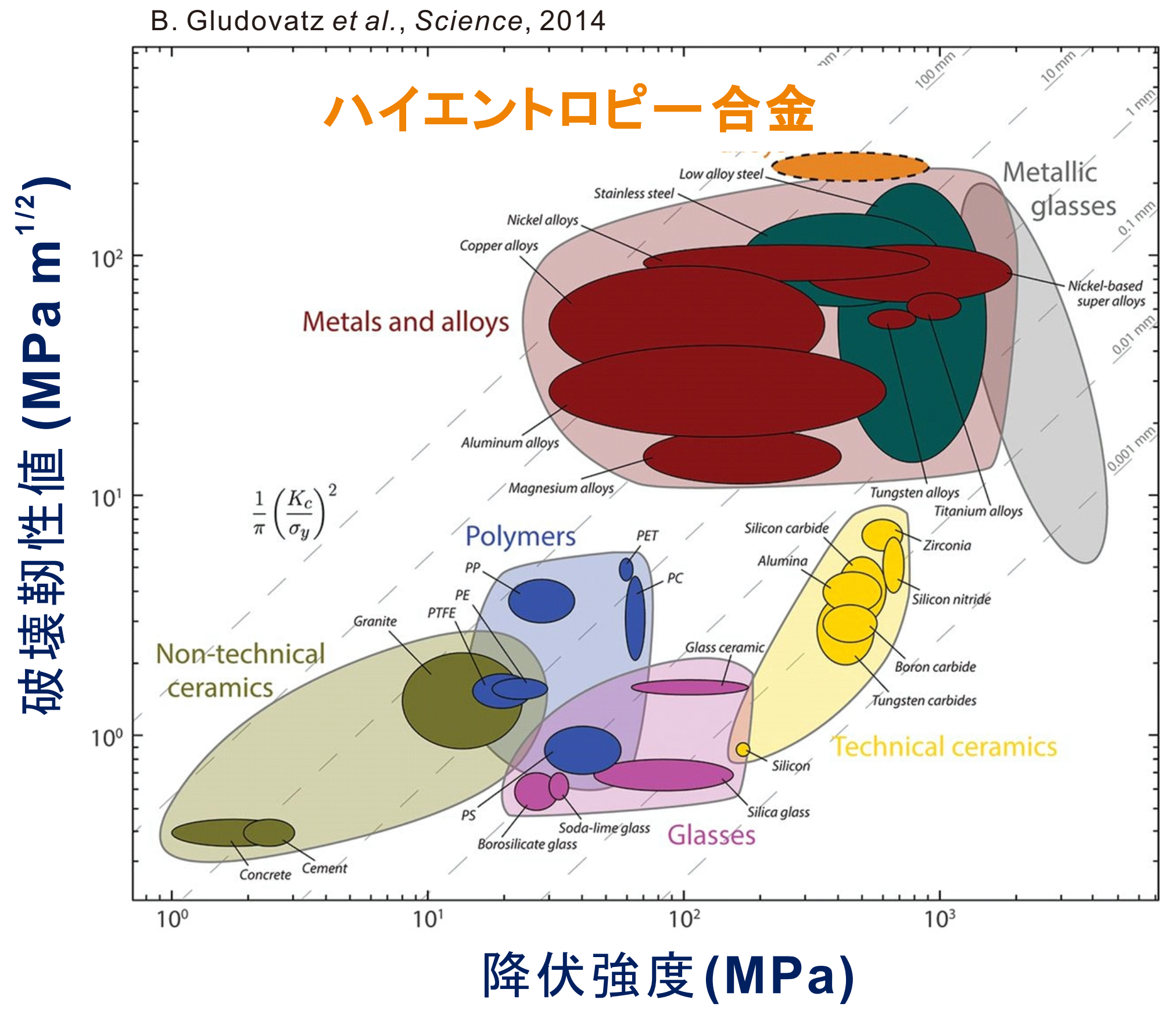
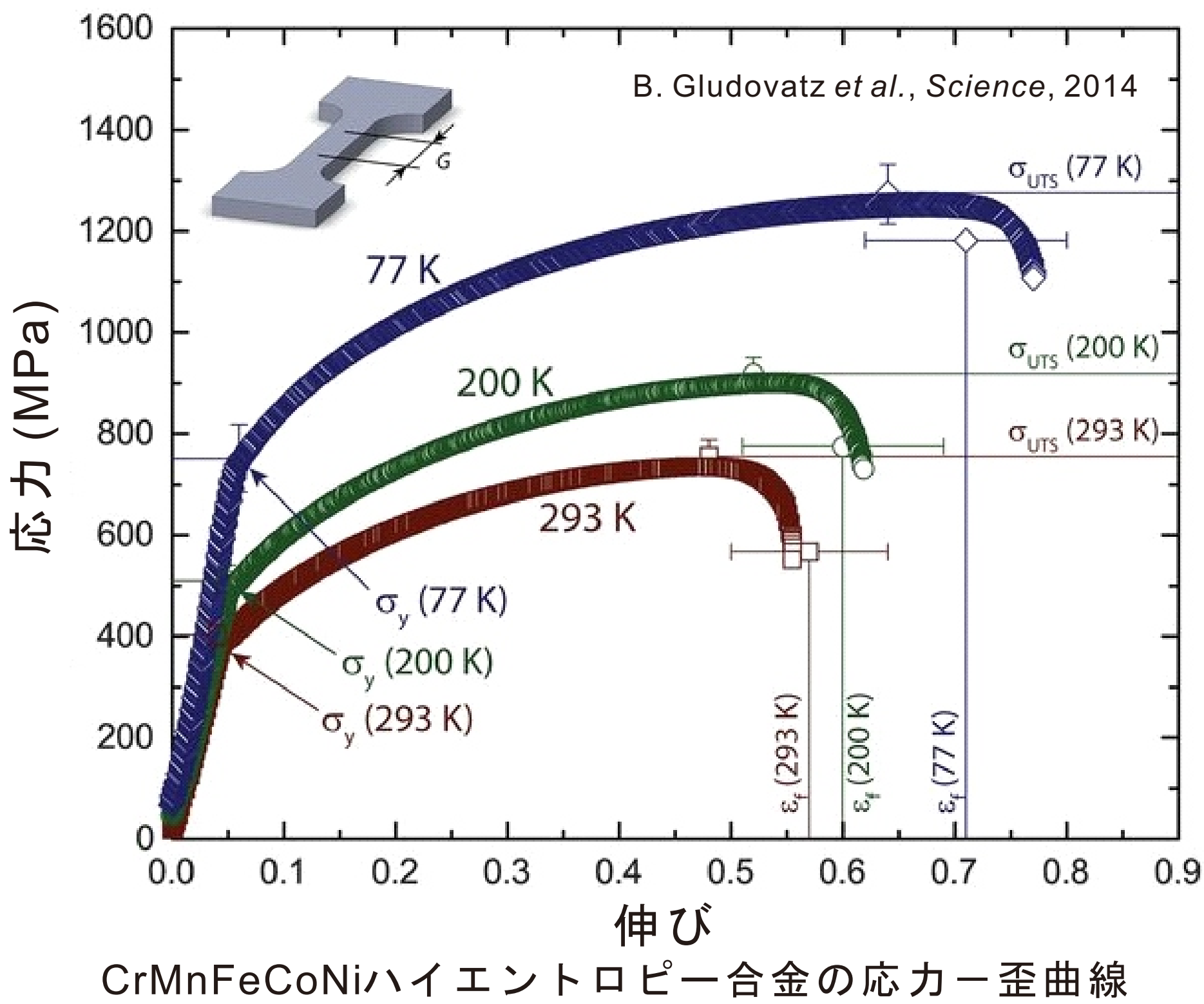
従来理論では  
立式不可能



特徴3:トレードオフの打破:強くてしなやかな夢の材料

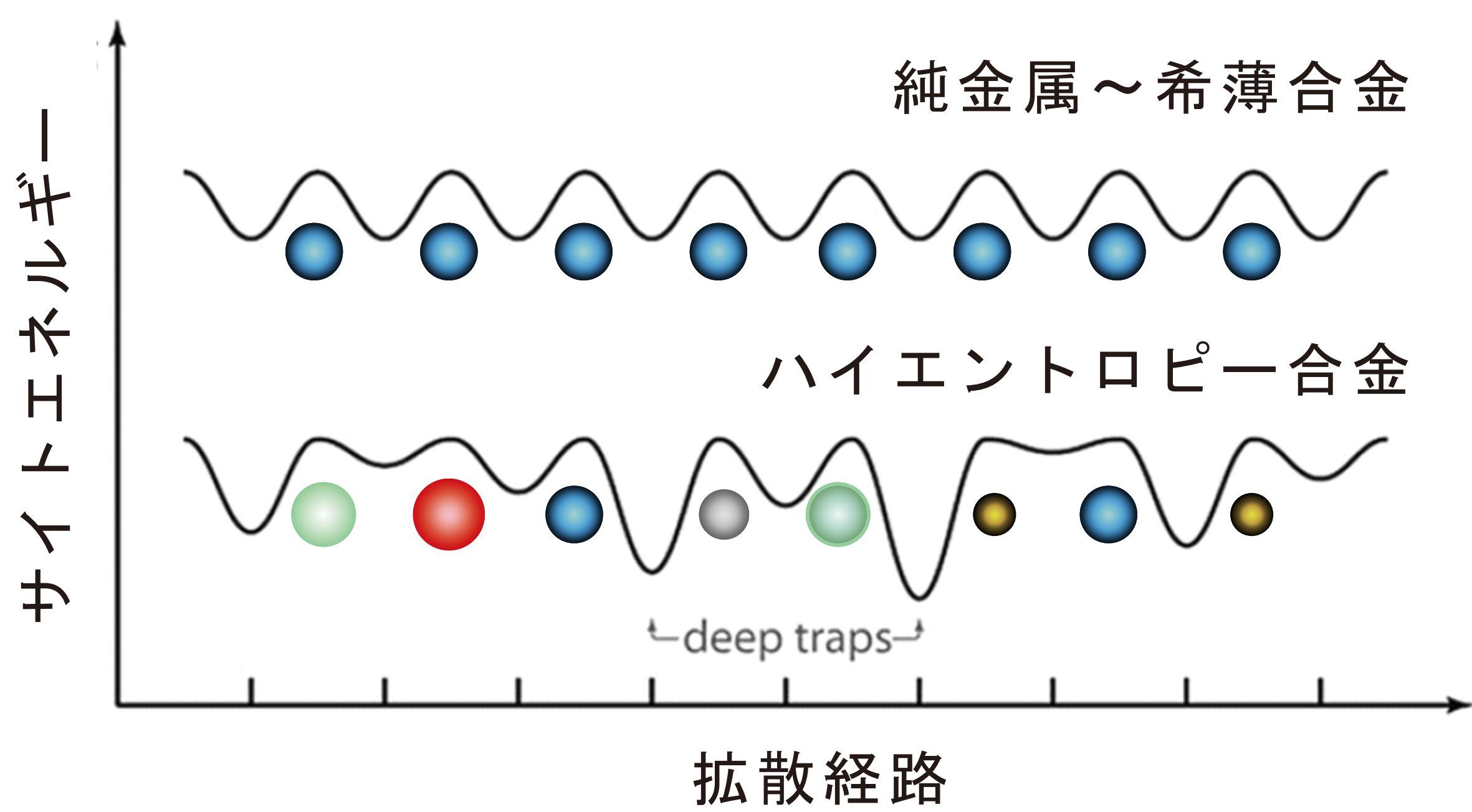
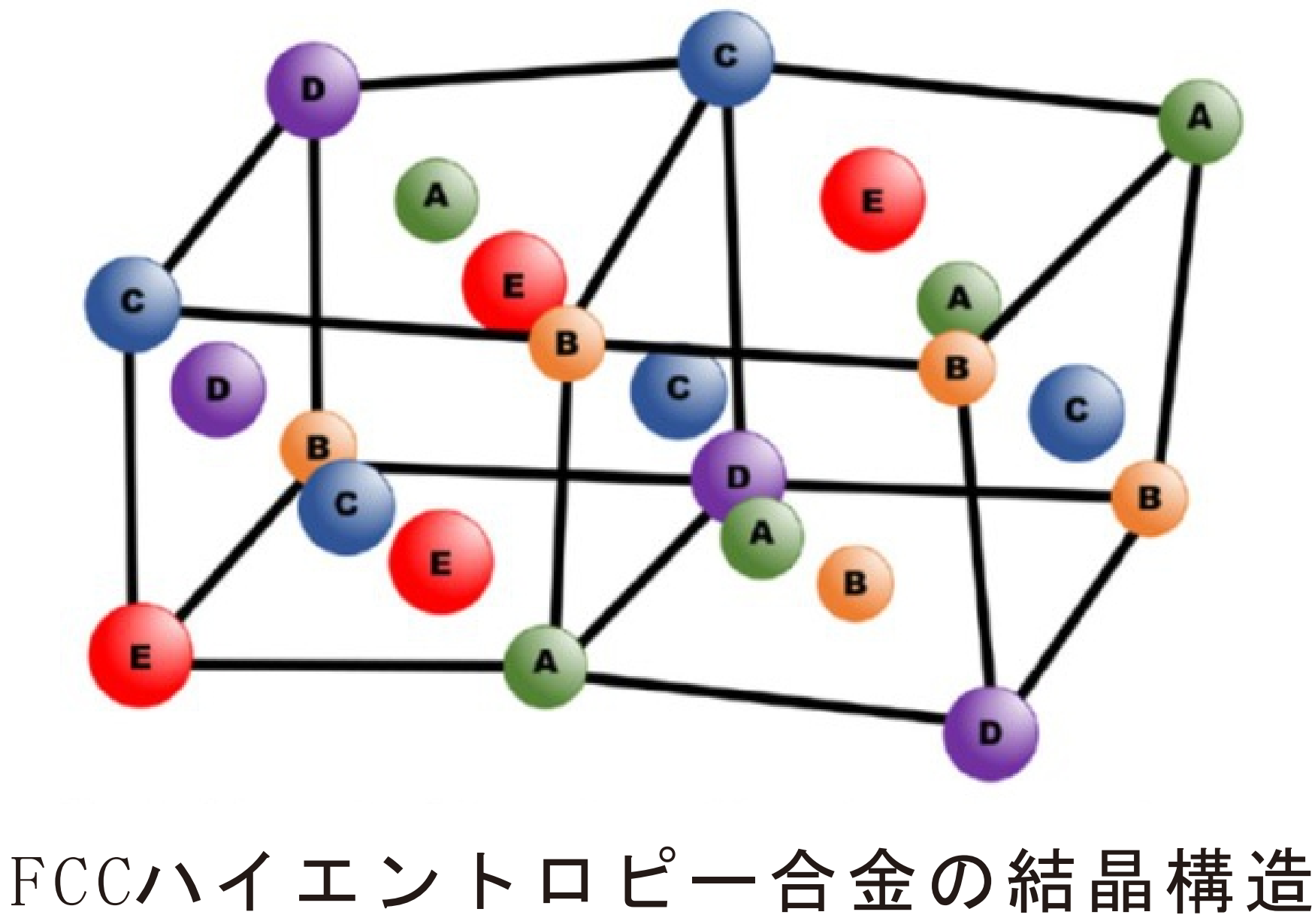


『強くてしなやかな材料』  
に求められる強度と韌性の  
両立は困難とされてきた



極度に歪んだ結晶格子による材料強化  
→ **Ni基超合金なみの強度** & **金属系材料最高クラスの破壊靱性値**を実現

特徴4:トラップ効果による遅い原子拡散



多様な原子サイズ、ランダムな配置によって生まれた局所的に深いエネルギーのサイトにトラップされる

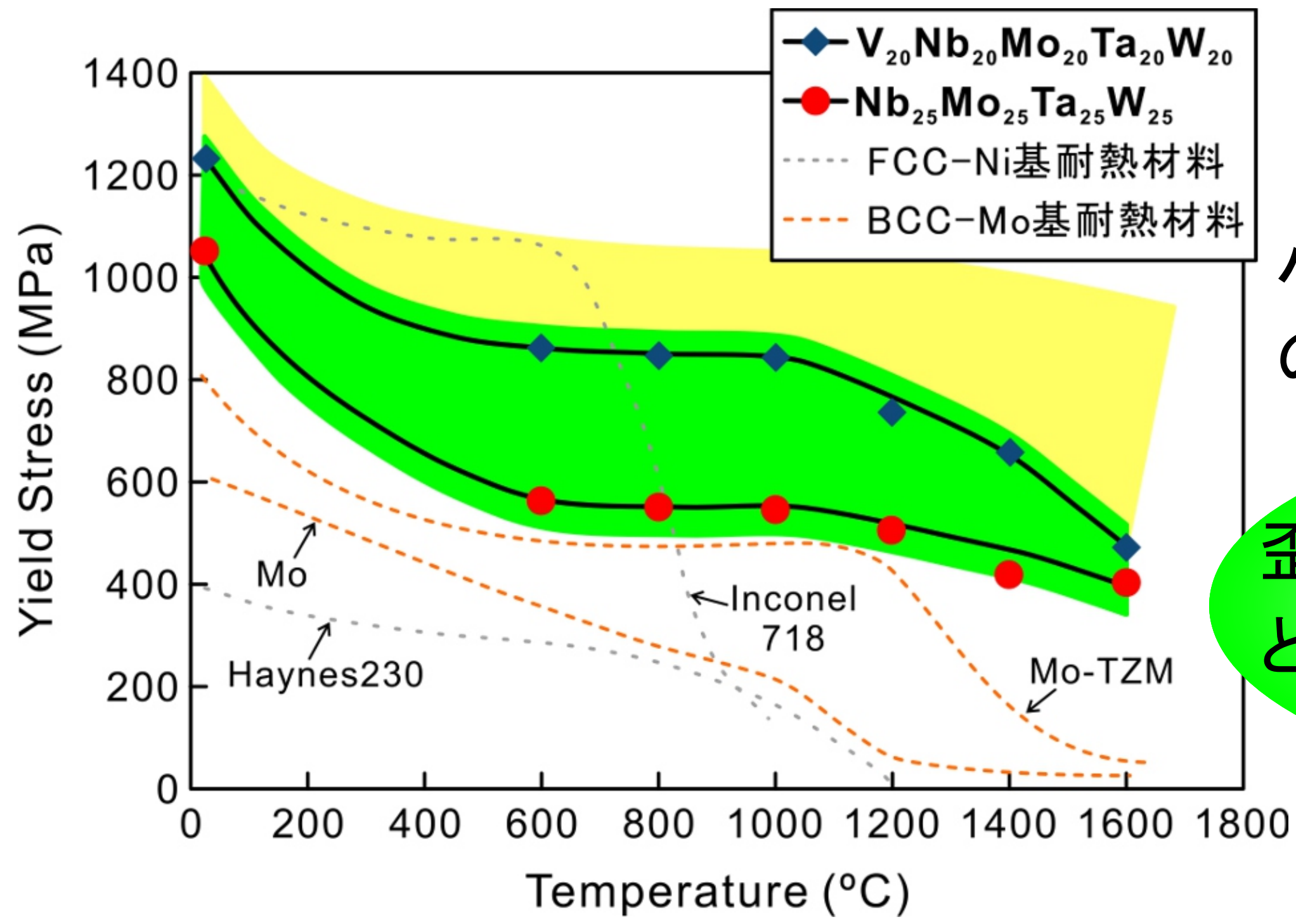
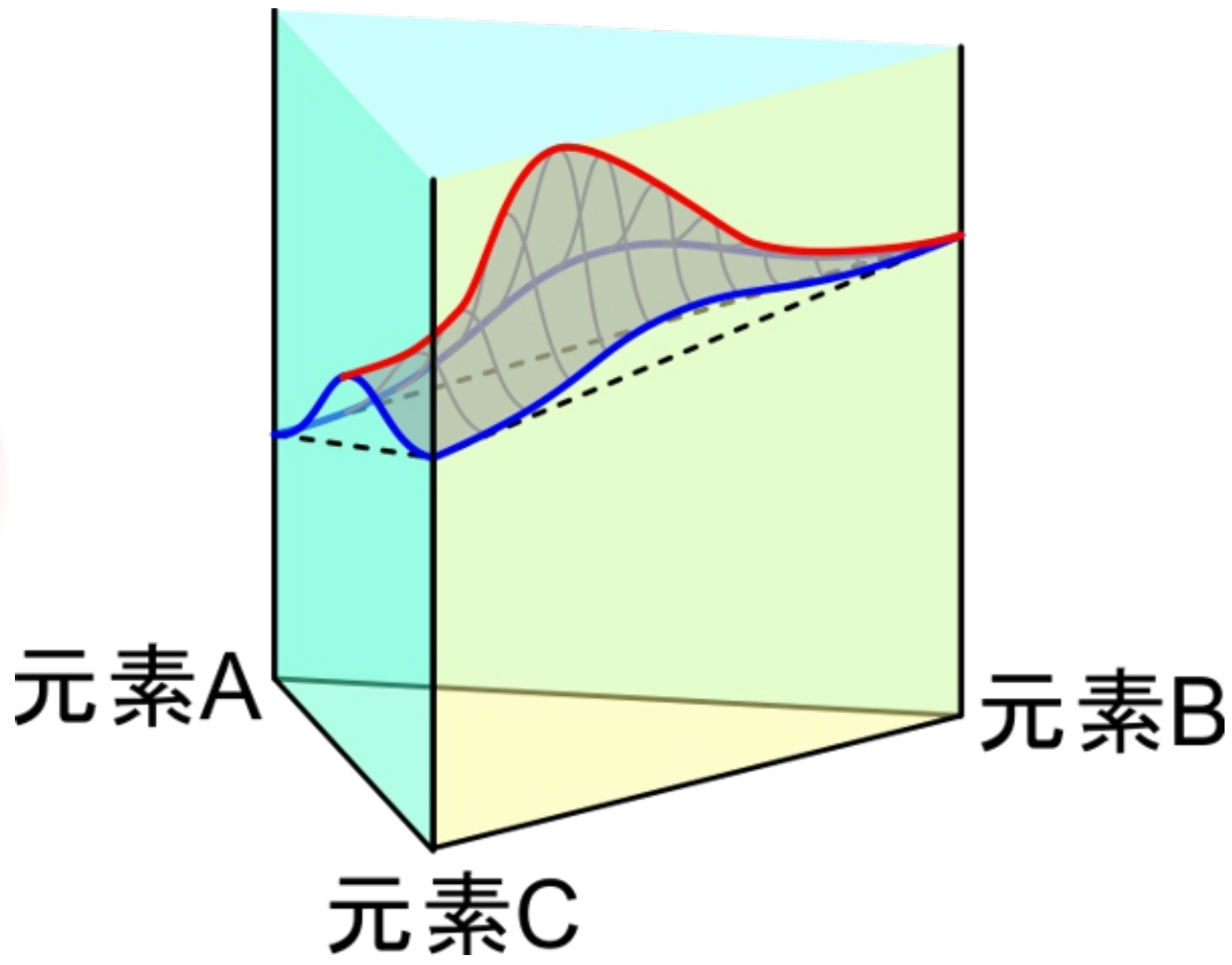
遅い原子拡散

材料の高温使用や  
長寿命化に有利

特徴5:物性発現のカクテル効果

カクテル効果とは

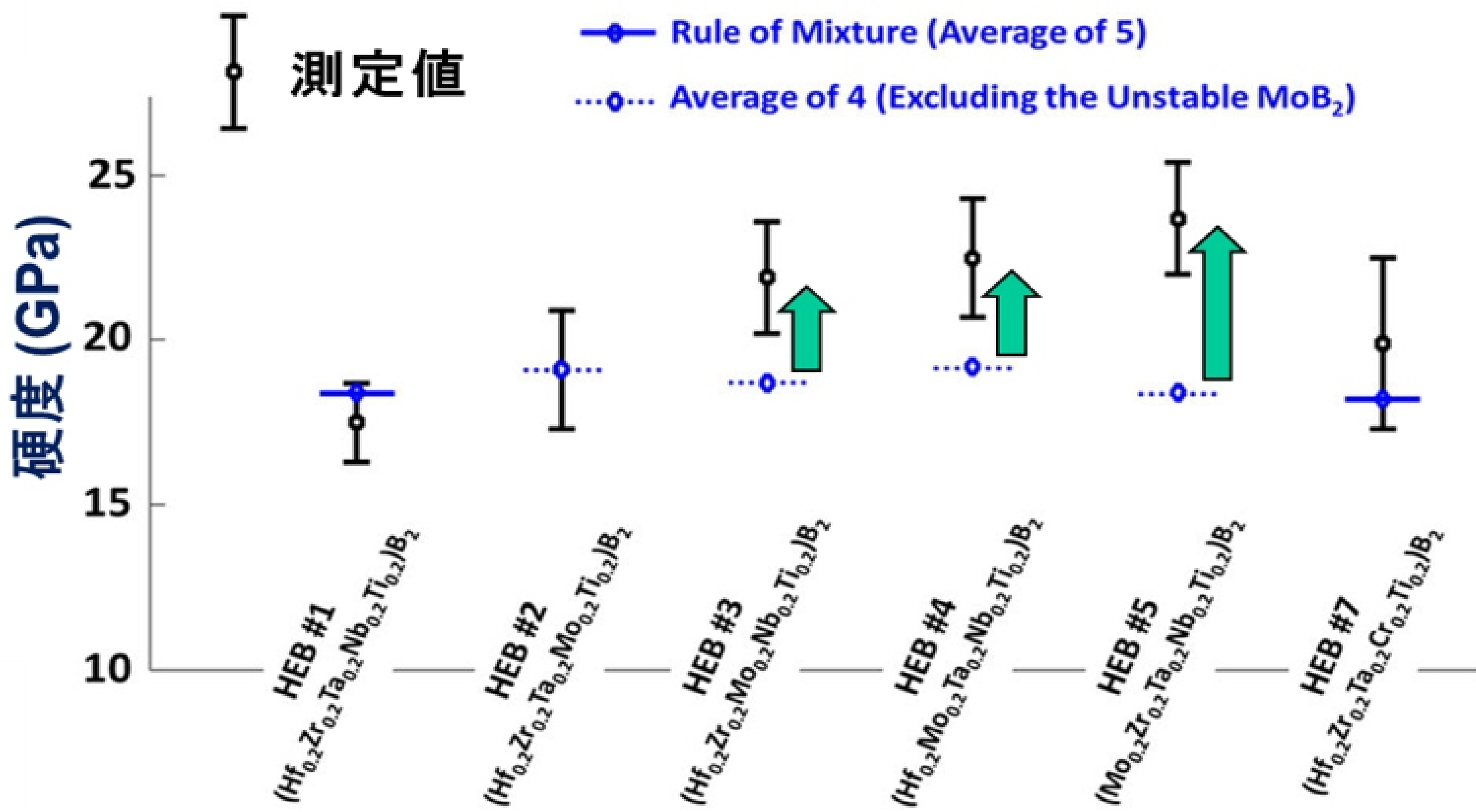
混合則による  
予測値を上回る  
物性の発現



ハイレントロピーBCC合金の優れた高温強度

歪んだ結晶格子による強化  
とトラップ効果による耐熱化

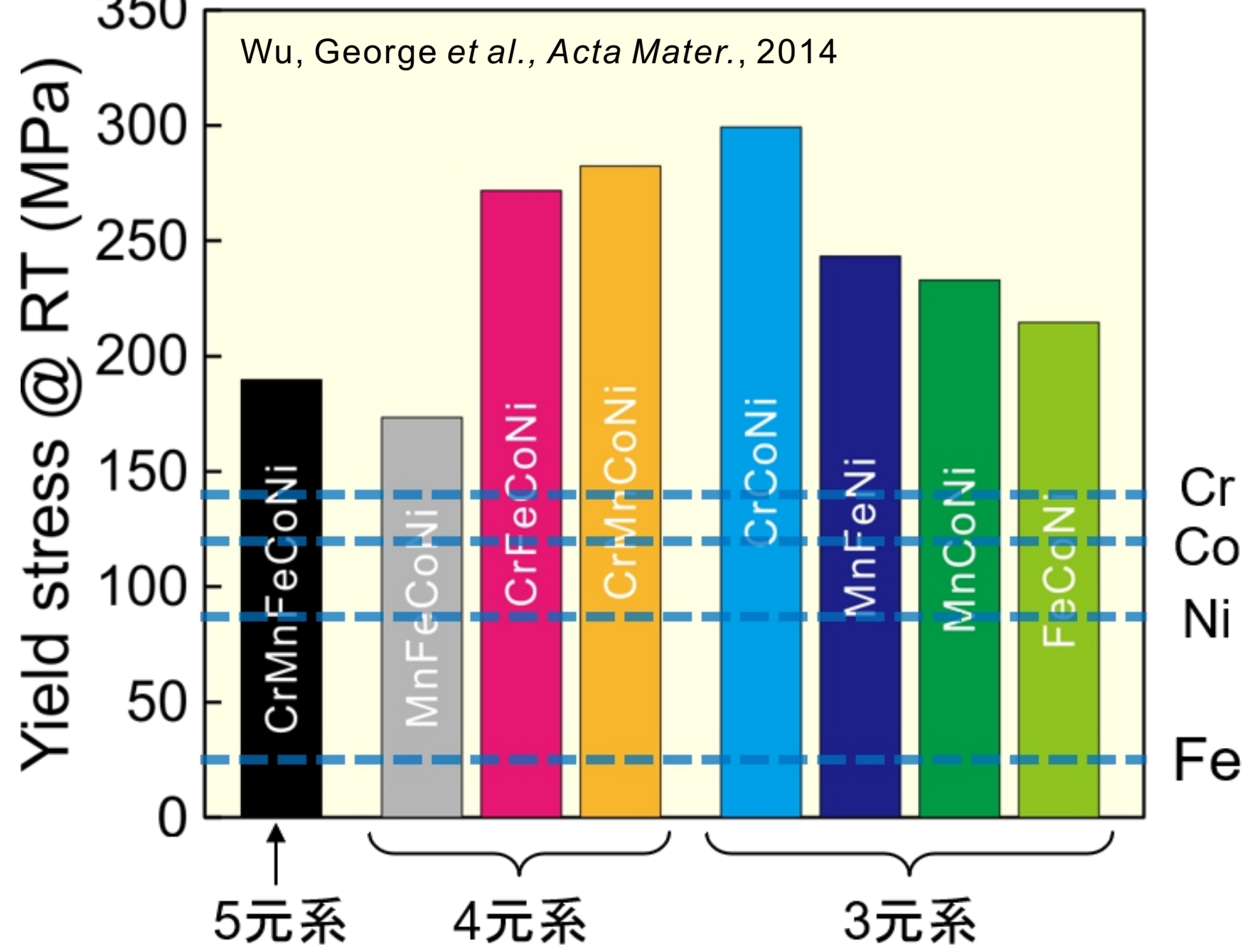
ハイレントロピー金属ボライドの硬度



単純混合則による  
推定値をはるかに  
上回る硬度

J. Gild et al., Sci. Rep., 2016

ハイレントロピーFCC合金の降伏強度

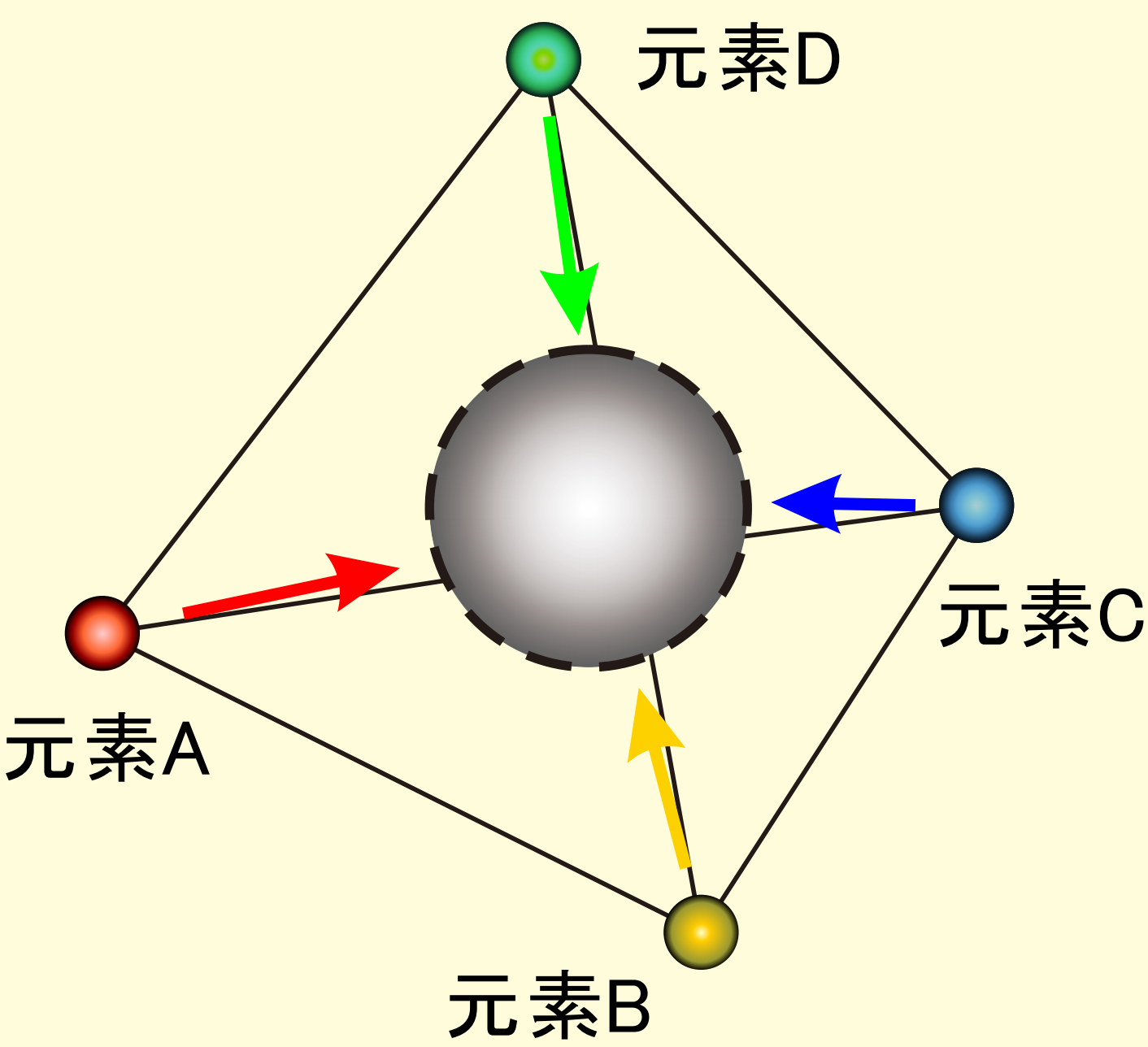


どの構成元素よりも  
優れた降伏強度を示す

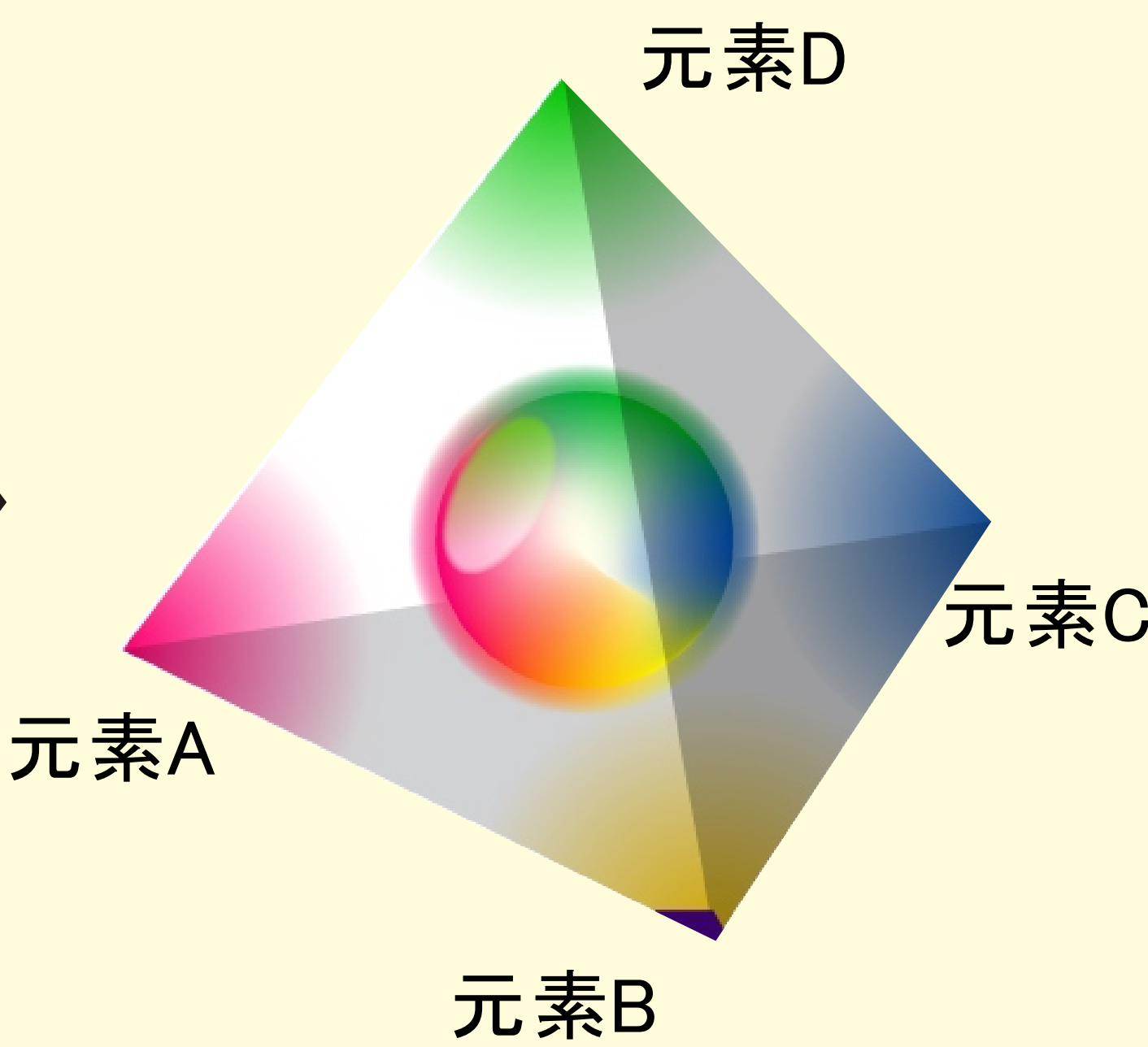
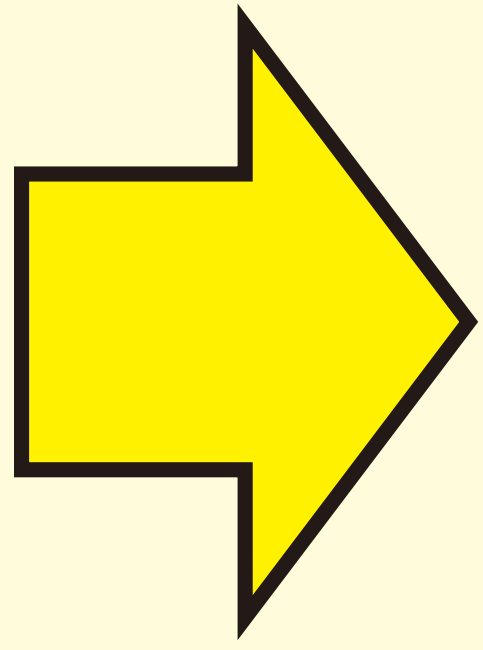
CoCrNi合金が最も優れている

『より多くの元素を  
混ぜればより強くなる』  
というわけではなく、  
組み合わせの最適化が必要

メタラジー(合金設計)のパラダイムシフト



従来のメタラジー  
純元素をスタートとする  
『足し合わせ』の概念



新しいメタラジー  
多元素混合状態を  
スタートとする  
『差し引き』の概念